

APLIKASI METODE BEDA HINGGA PADA PERSAMAAN SCHRÖDINGER MENGUNAKAN MATLAB

Odaligo Ziduhu Lombu¹, Tua Raja Simbolon², Tenang Ginting³

¹Mahasiswa FISIKA FMIPA USU

^{2,3}Dosen Pembimbing FISIKA FMIPA USU

ABSTRAK

Penerapan metode beda hingga pada persamaan Schrödinger dalam partikel dengan potensial halang dilakukan dengan pendekatan numerik dengan cara mengkonversikan metode beda hingga kedalam persamaan Schrödinger, kemudian di ubah dalam bentuk diskrit dan diformulasikan dalam bentuk program komputer menggunakan bahasa pemrograman Matlab (Matrix Laboratory). Hasil dari program komputer tersebut berupa visualisasi. Visualisasi persamaan Schrödinger pada partikel dengan potensial halang menggunakan perangkat lunak MATLAB dengan potensial penghalang konstan dalam suatu daerah sepanjang L , membentuk gelombang hiperbolik ($E < V$) dalam daerah $x > 0$, dan sederetan gelombang berdiri deBroglie ($E > V$).

Kata kunci: Persamaan Schrödinger, Metode Beda Hingga, MATLAB, Potensial Halang.

ABSTRACT

The application of finite difference methods to Schrödinger equation in particles for potential barrier uses numerical approach converting finite difference methods into Schrödinger equation, therefore Schrödinger equation will be converted into a discrete form and will be formulated into computer programme using Matlab (Matrix Laboratory) programme language. The result of the computer programme is visualization. The visualization of Schrödinger equation for the potential barrier using software a Matlab with the potential barrier constant according for field L , make a hyperbolic wave ($E < V$) for field $x > 0$, and stand wave deBroglie ($E > V$).

Keyword : Wave Schrödinger, Finite Difference Methods, Matlab, Potential Barrier.

1. PENDAHULUAN

Pada Fisika Kuantum dikenal adanya gejala penerowongan (*Tunneling Effect*) atau lebih dikenal dengan efek terobosan. Efek yang terjadi saat partikel akan menerobos suatu perintang yang berenergi lebih tinggi dari energi partikel tersebut. Partikel yang digunakan adalah elektron, hal ini disebabkan karena elektron merupakan partikel yang dapat bergerak bebas. Pada bilangan kuantum berapapun, besarnya energi yang dimiliki oleh sebuah partikel terhadap suatu perintang masih dimungkinkan partikel tersebut untuk dapat menerobos suatu "*Dinding*" perintang meskipun energinya lebih kecil daripada energi perintang[1].

Kejadian di atas dapat diidentikkan dengan sebuah elektron yang sedang bergerak dengan energi (E) akan melewati suatu perintang dengan energi potensial (V). Pada skala atomik benda bergerak tidak hanya berperilaku sebagai partikel, tetapi juga berperilaku sebagai gelombang. Karena pada keadaan atomik partikel berperilaku sebagai gelombang, maka analisis persamaan gelombang partikel atau dikenal dengan persamaan gelombang schrodinger dapat dilakukan dengan menggunakan model matematika dan menerapkan metode numerik untuk menyederhanakan penyelesaian matematisnya[2].

Salah satu metode numerik yang dapat digunakan untuk memecahkan persamaan differensial seperti pada persamaan gelombang Schrodinger adalah metode beda hingga (*Finite Difference Methods*). Metode beda hingga lebih mudah dari segi pemrograman dengan komputer dan konsepnya tidak sulit untuk dipahami. Pendekatan komputasi yang dapat digunakan untuk memecahkan persoalan tersebut adalah dengan memvisualisasikan permasalahan tersebut menggunakan MATLAB. Oleh karena itu, dalam penelitian ini digunakan metode beda hingga melalui pendekatan komputasi menggunakan MATLAB untuk menyelesaikan permasalahan persamaan Schrodinger dengan potensial halang[8].

2. TEORI

2.1 Metode Beda Hingga

Metode perbedaan beda hingga adalah metode yang sangat populer. Pada intinya metode ini mengubah masalah Persamaan Differensial Biasa (PDB) dengan nilai batas dari sebuah masalah kalkulus menjadi sebuah aljabar. Dengan metode ini persamaan differensial ψ' dan ψ'' akan diaproksimasikan dengan menggunakan deret Taylor sebagai berikut:

$$\psi(x+h) = \psi(x) + \frac{h}{1!}\psi'(x) + \frac{h^2}{2!}\psi''(x) + \dots (2.1)$$

$$\psi(x-h) = \psi(x) - \frac{h}{1!}\psi'(x) + \frac{h^2}{2!}\psi''(x) - \dots (2.2)$$

kalau dikurangi (2.1) dengan (2.2) dan nilai setelah pangkat 2 diabaikan maka akan didapat:

$$\psi'(x) = \frac{\psi(x+h) - \psi(x-h)}{2h} \quad (2.3)$$

apabila (2.1) ditambah dengan (2.2) akan diperoleh

$$\psi''(x) = \frac{\psi(x+h) - 2\psi(x) + \psi(x-h)}{h^2} \quad (2.4)$$

dengan metode perbedaan hingga yang dicari adalah ψ pada x tertentu:

$$x_{i+1} = x_i + h \quad (2.5)$$

Jika $i = 0$ maka $x_i = x_0 + h$ dengan menggunakan notasi ini persamaan (2.3) dan (2.4) dapat dituliskan:

$$\psi'(x_i) = \frac{\psi(x_{i+1}) - \psi(x_{i-1}))}{2h} \quad (2.6)$$

$$\psi''(x_i) = \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{h^2} \quad (2.7)$$

Persamaan (2.6) dan (2.7) dikenal dengan aproksimasi beda hingga tiga titik (*central three points finite difference approximation*)[4].

2.2 Persamaan Differensial Biasa (PDB) dengan Nilai Batas

Pada persoalan matematik lebih sering dijumpai PDB tingkat 2 dengan kondisi batas yang diberikan pada dua titik. Umumnya kedua titik ini ada pada batas-batas domain permasalahan. Karena solusi

yang dicari berada pada dua batas yang tertutup maka problem ini dikenal sebagai problem domain tertutup atau PDB dengan nilai batas. Bentuk umum dari PDB tingkat 2 dengan nilai batas adalah[7]:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + p(x)\frac{d\psi(x)}{dx} + q(x)\psi(x) = f(x) \quad (2.8)$$

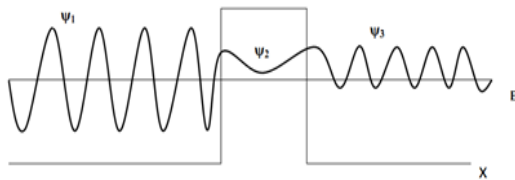
dengan nilai-nilai batas:

$$A_1\psi(x_0) + B_1\frac{d\psi}{dx}(x_0) = \alpha \quad (2.9)$$

$$A_2\psi(x_n) + B_2\frac{d\psi}{dx}(x_n) = \beta \quad (2.10)$$

2.3 Potensial Halang

Pada daerah I dan III, nilai $V_n = 0$, dan pada daerah II dengan batas $x = 0$ hingga $x = a$ memiliki energi potensial $V_n = V_0$



Gambar 2.1 Fungsi Gelombang Untuk $E < V_0$

Partikel dengan energi E yang lebih kecil daripada V_0 datang dari sebelah kiri. Daerah $x < 0$ berupa gelombang datang dan pantul berbentuk sinus, dalam daerah $0 \leq x \leq a$ dan kembali berbentuk sinus pada daerah $x > a$ yaitu gelombang transmisi[3].

1. Pada daerah I, $-\infty \leq x \leq 0$

$$V=0$$

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0$$

dengan

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

maka persamaan Schrödingerya menjadi:

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2} + k_1^2\psi_1 = 0 \quad (2.11)$$

1. Pada daerah II, $0 \leq x \leq a$,

$$\text{dan } E < V_0$$

$$V = V_0$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_2 = 0$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi_2 = 0$$

dengan

$$k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

maka persamaan Schrödingerya menjadi:

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2} + k_1^2\psi_2 = 0 \quad (2.12)$$

3. Pada daerah III, $a \leq x \leq \infty$

$$\frac{\partial^2\psi_3}{\partial x^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi_3 = 0$$

$$\frac{\partial^2\psi_3}{\partial x^2} + k_1^2\psi_3 = 0 \quad (2.13)$$

maka solusi dari persamaan (2.11), (2.12) dan (2.13) adalah sebagai berikut:

$$\psi_I = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (2.14)$$

$$\psi_{II} = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad (2.15)$$

$$\psi_{III} = Ee^{ik_1x} \quad (2.16)$$

dengan

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

menyatakan bilangan gelombang deBroglie yang membuat partikel di luar perintang[5].

2.4 Program Komputer

Program komputer adalah suatu urutan instruksi yang disusun secara sistematis dan logis dengan menggunakan bahasa pemrograman untuk menyelesaikan suatu masalah. Program komputer merupakan contoh perangkat lunak komputer yang menuliskan aksi komputasi yang akan dijalankan oleh komputer. Matlab menyediakan beberapa instruksi dasar yang memungkinkan pengguna membuat program atau fungsi, antara lain sebagai berikut[6]:

1. Statement if : untuk mengeksekusi sekumpulan instruksi yang diisyaratkan bernilai benar.
2. Statement switch : untuk mengeksekusi sekumpulan instruksi dari suatu ekspresi atau variable.
3. Statement for : digunakan untuk mengulang sekumpulan instruksi.
4. Statement while : untuk mengerjakan sekelompok perintah yang diulang secara tidak terbatas.
5. Statement break : untuk keluar lebih awal dari suatu loop for dan while jika kondisi yang sudah diinginkan sudah tercapai.
6. Grid dan legend : untuk member grid dan legend pada grafik.
7. Subplot : digunakan untuk menggambar lebih dari satu grafik dalam satu plot.

2. METODE PENELITIAN

3.1 Rancangan Penelitian

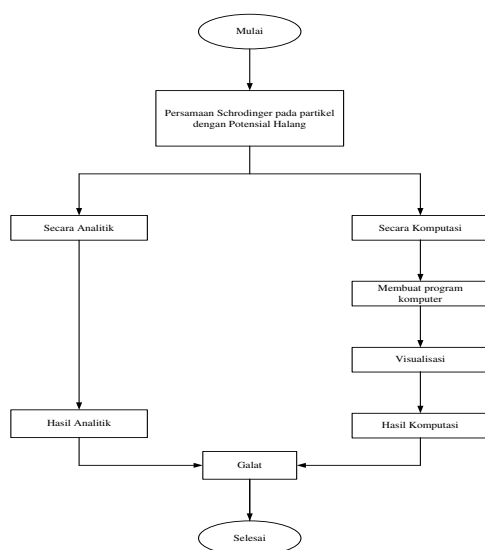
langkah-langkah penyusunan program dilakukan sebagai berikut:

- Membahas persoalan fisika
- Mengkonfirmasi persoalan fisika kedalam bentuk numerik
- Merancang struktur data
- Penyusunan algoritma
- Menterjemahkan algoritma kedalam kode bahasa pemrograman
- Menyusun kode tersebut menjadisebuah program komputer
- Menjalankan program
- Menganalisa hasil visualisasi
- Penulisan laporan.

3.2 Teknik Analisa Data

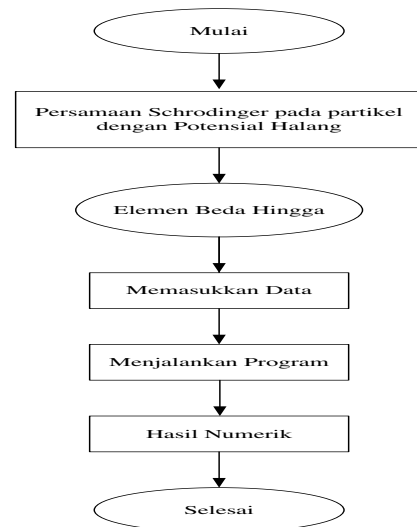
- Mengumpulkan data yang diperoleh dalam program, dan data tersebut dibuat dalam bentuk visualisasi.
- Hasil visualisasi permasalahan mekanika kuantum dengan pendekatan komputasi akan dilihat tingkat kesesuaiannya dengan hasil analitik.
- Nilai-nilai peluang dalam grafik visualisasi fungsi gelombang akan dibandingkan dengan hasil analitiknya untuk melihat tingkat kesesuaiannya.

3.3 Diagram Alir Penelitian



Gambar 3.1 Diagram alir penelitian

3.4 Diagram Alir Program



Gambar 3.2 Diagram Alir Program

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Solusi Numerik Persamaan Schrödinger pada Partikel dengan Potensial Halang.

Adapun yang menjadi pokok permasalahan dalam penelitian ini adalah persamaan Schrödinger dengan potensial halang (Barrier). Persamaan tersebut disebut juga dengan persamaan differensial orde dua. Untuk menyederhanakan Persamaan Schrödinger pada potensial halang (2.12) ke dalam bentuk numerik, dibutuhkan beberapa tahap.

- Persamaan (2.12) $\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi(x) = 0$ dikonversi ke persamaan umum PDB (2.8) $\frac{d^2 \psi}{dx^2} + p(x) \frac{d\psi(x)}{dx} + q(x) \psi(x) = f(x)$ sehingga diperoleh koefisien dari persamaan (2.12) $p(x) = 0$, $q(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$, dan $f(x) = 0$.
- Aproksimasi beda hingga turunan pertama pada persamaan (2.6)

$$\psi'(x) = \frac{\psi(x_{i+1}) - \psi(x_{i-1}))}{2h} \text{ dan turunan kedua pada persamaan (2.7)}$$

$$\psi''(x) = \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{h^2} \text{ disubstitusikan ke persamaan (2.8) maka didapatkan:}$$

$$\left[1 - \frac{1}{2}hp(x)\right]\psi(x_{i-1}) - [2 - h^2q(x)]\psi(x_i) + \left[1 + \frac{1}{2}hp(x)\right]\psi(x_{i+1}) = h^2f(x_i) \quad (4.1)$$

Atau dapat disederhanakan

$$\left[1 - \frac{1}{2}hp(x)\right]\psi_{i-1} - [2 - h^2q(x)]\psi_i + \left[1 + \frac{1}{2}hp(x)\right]\psi_{i+1} = h^2F(x) \quad (4.2)$$

dengan memasukkan nilai $p(x)$, $q(x)$, dan $f(x)$ tahap pertama ke persamaan (4.2), maka diperoleh persamaan sebagai berikut:

$$\left[1 - \frac{1}{2}h(0)\right]\psi_{i-1} - \left[2 - h^2\left(-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)\right]\psi_i + \left[1 + \frac{1}{2}h(0)\right]\psi_{i+1} = h^2(0) \quad (4.3)$$

$$\left[1\right]\psi_{i-1} - \left[2 - h^2\left(-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)\right]\psi_i + \left[1\right]\psi_{i+1} = 0 \quad (4.4)$$

atau

$$\psi_{i-1} - \left[2 - h^2\left(-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)\right]\psi_i + \psi_{i+1} = 0 \quad (4.5)$$

Persamaan (4.5) diterapkan pada setiap titik diskretisasi, yaitu $i = 1, 2, \dots, N-1$ sehingga terbentuk SPL dengan bentuk tri-diagonal yang dipecahkan dengan algoritma Thomas.

Untuk $1 \leq i \leq N-1$

$$i = 1 \quad -\left[2 - h^2\left(-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)\right]\psi_1 + \psi_2 + 0 + 0 = -\psi_0$$

$$i = 2 \quad \psi_1 - \left[2 - h^2\left(-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)\right]\psi_2 + \psi_3 + 0 = 0$$

$$i = 3 \quad 0 + \psi_2 - \left[2 - h^2\left(-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)\right]\psi_3 + \psi_4 = 0$$

$$i = N-1 \quad 0 + 0 + \psi_{n-2} - \left[2 - h^2\left(-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)\right]\psi_{n-1} = -\psi_n \quad (4.6)$$

dari $N-1$ persamaan linier di atas dapat dinyatakan dalam bentuk matriks dimensi $N \times N$, sebagai berikut:

bila diambil $k^2 = -\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}$ maka bentuk matriksnya menjadi,

$$\begin{bmatrix} -[2 - h^2(-k^2)] & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -[2 - h^2(-k^2)] & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -[2 - h^2(-k^2)] & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -[2 - h^2(-k^2)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\psi_0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ -\psi_n \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

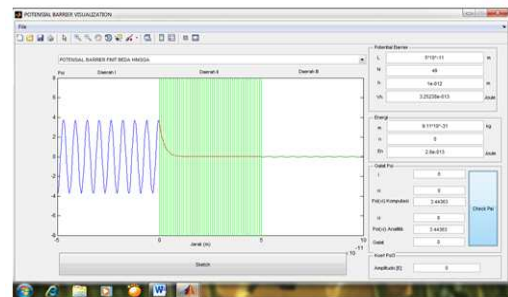
Pemecahan numerik menggunakan metode beda hingga pada persamaan Schrödinger di atas akan mempermudah dalam

pembuatan programnya, sehingga akan diperoleh bentuk visualisasi dari persamaan Schrödinger dengan potensial halang, dan hasil numerik tersebut akan dilihat tingkat kesesuaiannya dengan hasil analitiknya.

4.2 Visualisasi Program dalam Persamaan Schrödinger dengan Potensial Halang.

4.2.1 Potensial Halang dengan $E < V$

Fungsi gelombang partikel yang memiliki energi $E = 2.8 \times 10^{-13}$ J memasuki potensial halang $V = 3.25 \times 10^{-13}$ J, dimana energi tersebut lebih kecil dari potensial. Untuk jumlah langkah (N) = 49, fungsi gelombang tersebut dapat divisualisasikan sebagai berikut:



Gambar 4.1 Visualisasi persamaan Schrödinger pada partikel dengan potensial halang, dimana $E < V$.

Visualisasi gelombang pada gambar (4.1) menggambarkan suatu perbedaan fenomena antara mekanika klasik dan mekanika kuantum. Secara klasik, partikel tidak pernah ditemukan pada daerah $x > 0$ (daerah II), karena energi totalnya tidak cukup untuk melampaui potensial halang. Tetapi mekanika kuantum memperkenankan fungsi gelombang partikel dapat menerobos daerah II, akibatnya fungsi gelombang partikel pada $x > 0$ (daerah II) merupakan gelombang hiperbolik sedangkan pada daerah I dan daerah III merupakan gelombang berdiri deBroglie. Fenomena ini disebut dengan efek terobosan.

Tabel (4.1) berikut ini memperlihatkan hasil perhitungan solusi analitik dengan solusi pendekatan komputasi.

i	x_i	Ψ (Analitik)	Ψ (Komputasi)	Galat
0	0	3.44363	3.44363	0
1	1×10^{-12}	2.23305	2.24047	0.00741877
2	2×10^{-12}	1.44804	1.45768	0.00963751
3	3×10^{-12}	0.938995	0.948385	0.00938987
4	4×10^{-12}	0.608899	0.617032	0.00813209
5	5×10^{-12}	0.394846	0.401449	0.00660263
6	6×10^{-12}	0.256041	0.261188	0.00514639
7	7×10^{-12}	0.166032	0.169932	0.00389991
8	8×10^{-12}	0.107665	0.11056	0.00289502
9	9×10^{-12}	0.0698164	0.0719319	0.00211549
10	1×10^{-11}	0.045273	0.0467998	0.00152677
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
45	4.5×10^{-11}	1.17956×10^{-8}	1.36659×10^{-8}	1.87028×10^{-9}
46	4.6×10^{-11}	7.64899×10^{-9}	8.86602×10^{-9}	1.21703×10^{-9}
47	4.7×10^{-11}	4.96005×10^{-9}	5.7296×10^{-9}	7.69545×10^{-10}
48	4.8×10^{-11}	3.21639×10^{-9}	3.6682×10^{-9}	4.51806×10^{-10}
49	4.9×10^{-11}	2.0857×10^{-9}	2.29504×10^{-9}	2.09343×10^{-10}
50	5×10^{-11}	1.35249×10^{-9}	1.35249×10^{-9}	0

Tabel 4.1 Hasil perhitungan analitik dan komputasi

dengan $E < V$

pada tabel (4.1), untuk mendapatkan nilai dari ψ (analitik) digunakan $\psi_{II} = Ce^{-k_2 x_i}$ dengan nilai dari konstanta yang digunakan adalah Sehingga,

1. Untuk $i = 0$

$$\psi_{(x_i)} = Ce^{-k_2 x_i}$$

dengan $x_i = a + ih$ dan $a = 0$

maka

$$\psi_{(0)} = Ce^{-k_2 \cdot 0}$$

$$\psi_{(0)} = 3.443627945056147$$

2. Untuk $i = 1$

$$\psi_{(x_i)} = Ce^{-k_2 x_i}$$

dengan $x_i = a + ih$ dan $a = 0$

maka

$$\psi_{(1)} = Ce^{-k_2 h}$$

$$\psi_{(1)} = 2.233050623092972$$

3. Untuk $i = 2$

$$\psi_{(x_i)} = Ce^{-k_2 x_i}$$

dengan $x_i = a + ih$ dan $a = 0$

maka

$$\psi_{(2)} = Ce^{-k_2 2h}$$

$$\psi_{(2)} = 1.448041183558989$$

Dari data perhitungan secara analitik, diperoleh nilai yang hampir sama dengan nilai komputasi. Jika seluruh angka di belakang koma diikuti-sertakan, maka akan terlihat selisih antara solusi analitik dengan solusi pendekatan komputasi yang sangat kecil.

5. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian, dapat diambil kesimpulan :

1. Telah berhasil dibuat visualisasi persamaan gelombang Schrödinger pada partikel dengan potensial halang (barier) menggunakan perangkat lunak MATLAB.
2. Pemecahan persamaan Schrödinger untuk partikel yang masuk melalui rintangan atau penghalang potensial dimana potensial penghalang konstan dalam suatu daerah sepanjang L menggunakan program Matlab membentuk gelombang hiperbolik ($E < V$) dalam daerah $x > 0$ dan sederetan gelombang berdiri deBroglie ($E > V$).

5.2 Saran

Adapun beberapa saran yang ingin disampaikan penulis untuk mengembangkan penelitian ini pada kesempatan penelitian berikutnya adalah

1. Untuk mencari solusi persamaan Schrödinger dapat diterapkan dalam metode lain.
2. Dilakukan penyempurnaan program visualisasi untuk melihat pengaruh variabel-variabel lain yang berhubungan dengan penyelesaian persamaan Schrödinger dan menerapkannya dalam dua atau tiga dimensi untuk lebih memahami perilaku partikel.

DAFTAR PUSTAKA

1. Eisnberg, R.dan Resnick, R, 1970, Quantum Physics, Jhon Wiley & Sons, New York, California.
2. URL:
<http://www.scribd.com/doc/94803529/Makalah-Kuantum-Tunneling>.
3. Krene, K.,1992, Fisika Modern (Modern Physics), Terjemahan, Jakarta, Penerbit UI-Press.
4. Madsen, Bruum C, 2006, Solution of the Schrödinger Equation by Finite Difference Method,University of Aarhus, Denmark.
5. Murugesan,R.,2007, Modern Physics, S.Chand & Company LTD, Ram Nagar, New Delhi
6. Sugiharto,Aris,2006, Pemrograman GUI dengan Matlab, Penerbit ANDI, Yogyakarta.
7. Triatmodjo,Bambang,2002, Metode Numerik, Yogyakarta, Penerbit Universitas Gajah Mada.
8. Zettili,Neuredine,2009, Quantum Mechanics concepts and Application, John Wiley & Son, New York, California.